

This Page Is Inserted by IFW Operations  
and is not a part of the Official Record

## **BEST AVAILABLE IMAGES**

Defective images within this document are accurate representations of the original documents submitted by the applicant.

Defects in the images may include (but are not limited to):

- BLACK BORDERS
- TEXT CUT OFF AT TOP, BOTTOM OR SIDES
- FADED TEXT
- ILLEGIBLE TEXT
- SKEWED/SLANTED IMAGES
- COLORED PHOTOS
- BLACK OR VERY BLACK AND WHITE DARK PHOTOS
- GRAY SCALE DOCUMENTS

**IMAGES ARE BEST AVAILABLE COPY.**

**As rescanning documents *will not* correct images,  
please do not report the images to the  
Image Problem Mailbox.**

# PATENT ABSTRACTS OF JAPAN

(11)Publication number : 05-089160

(43)Date of publication of application : 09.04.1993

(51)Int.Cl.

G06F 15/353

G06F 15/31

(21)Application number : 03-247297

(71)Applicant : HITACHI LTD

(22)Date of filing : 26.09.1991

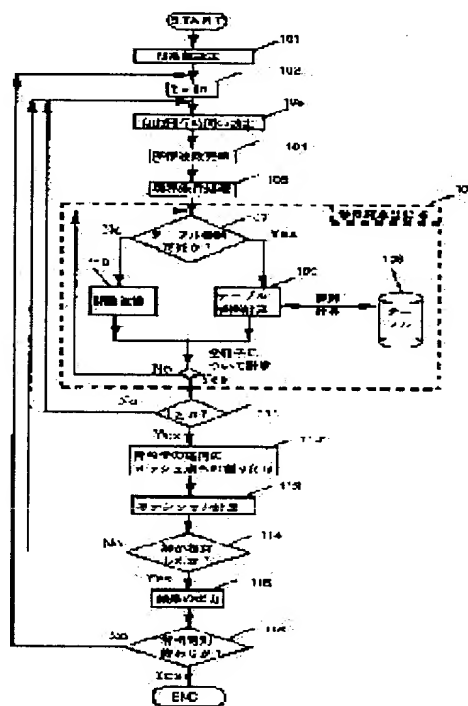
(72)Inventor : OKURA YASUYUKI  
IHARA SHIGEO

## (54) MONTE CARLO SIMULATION METHOD

### (57)Abstract:

**PURPOSE:** To speed up a calculation without degrading precision even if a complicated function is included in a Monte Carlo method by combining a table calculation and a sequential calculation.

**CONSTITUTION:** In a simulator system which needs to repeat a functional calculation for multiple times by a variable which is random at every event by a Monte Carlo method, it is judged that a scattering probability table can be referred to or not as to respective particle scattering mechanisms in the calculation 106 of scattering probability including the complicated function. A table reference calculation 109 is executed by using a table 108 as to the possible one. Functional calculation 110 is executed as to the impossible one. Potential is updated at every time interval. When it comes to that time, the charge of respective particles is allocated 112 on mesh points on a real space and potential calculation 113 is executed. The convergence of a solution is recognized 114, and a result is calculated and outputted 115. Thus, storage capacity can be reduced and calculation can be speeded up.



## LEGAL STATUS

[Date of request for examination]

[Date of sending the examiner's decision of rejection]

[Kind of final disposal of application other than the examiner's decision of rejection or application converted registration]

[Date of final disposal for application]

[Patent number]

[Date of registration]

[Number of appeal against examiner's decision of rejection]

[Date of requesting appeal against examiner's  
decision of rejection]

[Date of extinction of right]

Copyright (C); 1998,2003 Japan Patent Office

特開平 5 - 8 9 1 6 0

(43) 公開日 平成5年(1993)4月9日

(51) Int. Cl.<sup>5</sup>G 0 6 F 15/353  
15/31

識別記号

庁内整理番号

F I

技術表示箇所

6798-5 L

Z 6798-5 L

審査請求 未請求 請求項の数 6

(全 9 頁)

(21) 出願番号 特願平3-247297

(22) 出願日 平成3年(1991)9月26日

(71) 出願人 000005108

株式会社日立製作所

東京都千代田区神田駿河台四丁目6番地

(72) 発明者 大倉 康幸

東京都国分寺市東恋ヶ窪1丁目280番地 株  
式会社日立製作所中央研究所内

(72) 発明者 井原 茂男

東京都国分寺市東恋ヶ窪1丁目280番地 株  
式会社日立製作所中央研究所内

(74) 代理人 弁理士 小川 勝男

(54) 【発明の名称】 モンテカルロシミュレーション方法

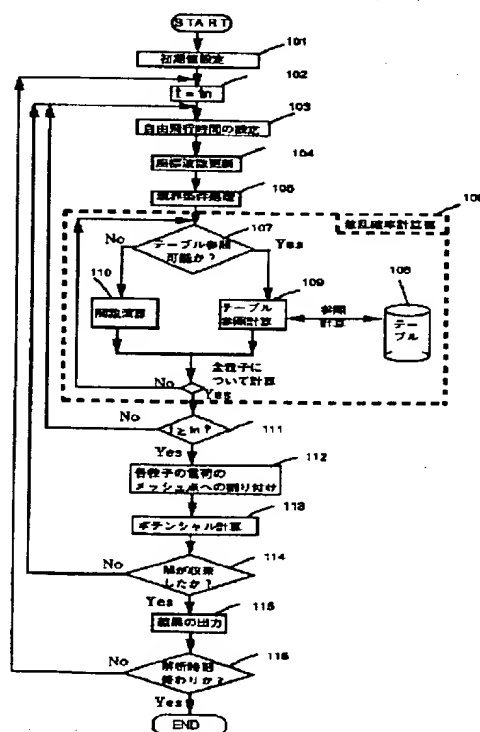
(57) 【要約】

【目的】モンテカルロ法において複雑な関数を含む場合でもその精度を落とさずに高速化することである。

【構成】複雑な関数演算を含む散乱確率の計算 106 において、散乱確率テーブルと逐次計算を併用し各粒子各散乱機構についてテーブル参照が可能かどうか判断し、可能なものは散乱確率テーブル 108 を使用してテーブル参照計算 109 を行ない、不可能なものは関数演算 110 を行なう。

【効果】乱数的変数による複雑な関数演算を含むモンテカルロ法を高速化出来るので、それに伴い物理現象理解の促進が期待される。

(図 1)



## 【特許請求の範囲】

【請求項1】モンテカルロ法によって、事象ごとにランダムな変数により関数演算を多数回繰り返す必要があるシミュレータシステムにおいて、関数演算が複雑な場合に高速化を図るためのテーブル化を行う機能を備え、かつテーブル化をする部分としない部分を混在させて計算の効率化を図ることを特徴とするモンテカルロシミュレーション方法。

【請求項2】請求項1記載の手法において、テーブル変数値での関数値及び1次あるいは多数次の導関数値をテーブル変数値から計算することにより、テーブル変数値の近傍の変数値での関数値を、テーブル値間の内挿及びテーブル値領域の外側の外挿により求めることを特徴とするモンテカルロシミュレーション方法。

【請求項3】請求項1記載の手法において、変数領域の一部のみをテーブル化して、テーブル化されていない領域においては、具体的変数からの関数演算の結果を、計算が進み必要になった時点で計算して、テーブルに追加することを特徴とするモンテカルロシミュレーション方法。

【請求項4】請求項1記載の手法において、変数の領域を空間メッシュ分割することにより各メッシュごとにテーブルを管理、参照をする機能を含むことを特徴とするモンテカルロシミュレーション方法。

【請求項5】請求項4記載の手法において、テーブル化されていない領域にある特定の変数値に対する関数値を求めるときに、新たにその変数値を含む領域をテーブル化する場合、テーブル化するための離散化した点を設けて関数値を求めることにより、テーブル管理を容易にするステップを含むことを特徴とするモンテカルロシミュレーション方法。

【請求項6】請求項4記載の手法において、変数の値の分布が様でない場合変数の現われ方から判断して、自己組織的にテーブルの構造を再編成する機能を含むことを特徴とするモンテカルロシミュレーション方法。

## 【発明の詳細な説明】

## 【0001】

【産業上の利用分野】本発明はコンピュータを用いて確率的現象を数値的に解析するシミュレーション方法に関する。

## 【0002】

【従来の技術】モンテカルロ法とは乱数を発生させて確率的現象を解析する方法であり、粒子の挙動を計算するプラズマ物理、流体力学、分子動力学、半導体特性解析等の計算や統計的現象の最適化等広い分野で用いられている。ところで従来のモンテカルロ法においては計算時間が非常に大きいため、本来複雑な関数演算を単純化する場合が多かった。しかし物理現象を正確に計算するためには複雑な機構に基づいた確率分布を導出して用いる必要がある。例えば半導体デバイス特性解析の場合、電

子の運動量とエネルギーの関係を近似式を用いずに正確に考えた場合に、電子が散乱する確率は電子の散乱前の運動量とその散乱後の散乱方向に依存しており、その依存性は波動関数の解が含まれているため単純に関数形で表記出来ない。このような解析の例はフィジカルレビュービー、38(1988年)第9721頁から9745頁(Physical ReviewB, 38, (1988) pp 9721-9745)に記載されている。そこでは計算時間の節約のため電子の散乱前の運動量とその散乱後の散乱方向に依存した散乱確率はテーブルとして記憶しており、乱数によってテーブルを参照して散乱後の散乱方向を確率的に選択している。

## 【0003】

【発明が解決しようとする課題】しかしながら上記従来技術では、運動量空間が3次元であり、散乱の方向もまた3次元であるため、6次元のテーブルを作る必要があり、記憶容量が膨大になるという問題点がある。また膨大なテーブルを作成する計算コストも大きい。しかしながらテーブルを作らずに逐次計算する場合、関数が複雑であるため効率的ではない。ところで、粒子の取りうる運動量の分布は解析する例題に依存する。そこでテーブル化の工夫することにより、記憶容量と計算量の削減が望まれる。本発明の目的はモンテカルロ法において複雑な関数を含む場合でも、その精度を落とさずに高速化するシミュレーション方法を提供することである。

## 【0004】

【課題を解決するための手段】上記目的を達成するために、入力データをもとに、関数演算を多数回繰り返す場合に、頻繁に出現しうる変数範囲において、この方法は、関数が特異点の近傍でなく、内挿または外挿により精度良く近似出来る場合、特に有効である。システムにより予め設定された判断基準に従って、テーブルを作成する。テーブル作成後、乱数的に現われる具体的変数について関数値が必要になった時点において、テーブルの参照が可能かどうかを判断し、可能である場合、テーブルを参照して内挿または外挿計算を行なう。すなわちテーブルを参照して計算する部分とテーブル化しないで逐次計算する部分を組み合わせることによりモンテカルロ法の計算の高速化及び効率化が実現される。

【0005】ところで、モンテカルロ法で計算する特性は、計算の初期におおよそその特性が予測される場合、前記方法により計算の高速化及び効率化が実現されるが、初期の段階で予測がつかない場合、または過渡的に大きな特性変化が予想されている場合には、必ずしも計算の高速化及び効率化が最適ではない。そこで、初期のテーブル構成だけでは変数の現われ方の傾向をシステム自身が分析して、必要に応じてテーブルの再構成を行なうことによりモンテカルロ法の計算の高速化及び効率化の最適化が実現される。

## 【0006】

【作用】上記のようにテーブル演算と逐次演算を組み合わせることにより、全ての領域をテーブル化する従来法に比べ記憶容量と計算時間の大幅な低減が可能である。

#### 【0007】

【実施例】ここでは、半導体のデバイスシミュレータを例にとり説明する。図1には本発明の一実施例のフローチャートを示す。すなわち初期値読み込み設定部101において解析に必要な構造や電子、正孔などの粒子分布の初期値を読み込み設定する。次に102において時刻を設定し、自由飛行時間の設定103をする。自由飛行時間中粒子はシステム内の電場により移動するので座標及び波数の更新104及び境界条件処理105を行なう。次に106にて粒子が結晶場の振動やポテンシャル場や粒子同士の相互作用によって散乱される確率の計算をする。各粒子各散乱機構について散乱確率テーブル参照が可能かどうか判断し、可能なものはテーブル108を使用してテーブル参照計算109を行ない、不可能なものは関数演算110を行なう。ポテンシャルは自由飛行時間より長いある時間間隔毎に更新する。111においてポテンシャルを更新する時刻になることを判断し、更新時刻において各粒子の電荷を実空間上のメッシュ点に割り付け112を行ない、ポテンシャル計算113を行なう。解の収束を確認114をして、結果を計算出力115をする。解析時刻の終わり116まで行なう。

【0008】本発明ではテーブルを参照して計算する部分とテーブル化しないで逐次計算する部分を組み合わせることにより、記憶容量の節減と計算の高速化を実現する。

【0009】図2には図1に示した実施例の散乱確率テーブル108の構造を示す。離散変数値21に対してテーブル値22を計算する。離散変数とは図1の実施例の散乱確率テーブルでは粒子の運動量またはエネルギーと、散乱機構の選択及び散乱方向の選択のために発生された乱数である。散乱確率テーブル値とは散乱機構及び散乱方向である。散乱確率は結晶場の振動やポテンシャル場や粒子同士の相互作用によって起こるもので、結晶場の相互作用を量子力学的に解いた解として、運動量またはエネルギー及び散乱方向の関数で表わされる。今、散乱確率を $F(X, Y)$ と置く。一般に $F(X, Y)$ は単純な解析式では表現出来ないので選ばれた乱数に対して散乱機構の選択及び散乱方向の選択を散乱確率テーブルを参照することにより決定する。散乱確率テーブルは運動量またはエネルギー、散乱機構、散乱方向と3つに階層化されている。

【0010】ところで、散乱確率テーブルに必要とされる記憶容量について以下に論じる。半導体デバイス中のように粒子の挙動が結晶場のポテンシャルに束縛されている場合の粒子の挙動をコンピュータシミュレーションにより解析する場合、その運動や散乱確率が本質的には単純な解析式では表現出来ない。特に結晶場のバンド構

造を正しく取り入れた場合、粒子の散乱確率及びその方向依存性の計算は非常に複雑になる。ところで、現実にあるデバイスを2次元に近似した構造をポアソン方程式と自己無撞着になるように解析しようとする、必要となる粒子は1万程度、また、解が安定するまでに一般に1粒子あたり1万程度の散乱の解析が必要である。すなわち1回の解析において1億回程度の散乱の計算が必要である。散乱確率及びその方向依存性は粒子の3次元的な運動量の関数として与えられるもの、エネルギーの関数として与えられるもの等がある。特に3次元的な運動量の関数を考えた場合、散乱方向の依存性も考えると6次元の精度の高いテーブルが必要になり、これを作成するためには、記憶容量が膨大になる。前記記載の従来例においては運動量空間を約4万点に等分割して4億バイトの記憶容量を必要と記載されている。しかし4億(400メガ)バイトの記憶容量は最大級のコンピュータの最大記憶容量に匹敵するため、この規模の散乱確率テーブルを使うシミュレータが多用されることは現状ではかなり困難であろう。また、前記記載の従来例でも述べられているようにこの記憶容量でも計算精度は不十分である。本発明においては単純に散乱確率テーブルを生成する従来の方法に対して出現頻度の多い運動量座標付近のテーブル化が効率的になる散乱機構のみをテーブル化し、テーブル化が効率的でない場合はその度ごとに計算することに特徴がある。

【0011】図3に図1に示した前記実施例を1次元の場合についてグラフに示したものである。すなわち変数値に対して離散的な散乱確率テーブル点で関数演算したテーブル値31があり、テーブル値から内挿出来る領域32で内挿を行ない、その他の領域(テーブル化しない領域33)は変数が現われて関数値が必要ならば具体的に計算する。変数値としては運動量またはエネルギーをとるならば、テーブル値として全散乱確率の値とする。あるいは、変数値として散乱機構の選択のために発生された乱数をとるならば、変数値として各散乱機構の散乱確率の値とする。あるいは、変数値として散乱方向の選択のために発生された乱数をとるならば、テーブル値として散乱機構及び散乱方向の値とする。

【0012】図4は本発明の実施例におけるテーブル参照計算109のための散乱確率テーブル値間の補間法の一例を示したものである。109での計算のための補間関数を初期値設定部101の一部で設定しておく。単純な補間法としては線形補間があるが、記憶容量の制限から線形補間に十分な間隔でテーブルを作ることが出来ない場合もある。そのために初期値設定部101の中で、まず、41で具体的変数からの関数演算の結果のテーブル化と同時にテーブル変数値間の2次以上までの導関数を計算する。次に42でテーブル値間に適切な補間曲線が設定出来るかどうか判断を行ない、可能なときは43で補間関数を設定する。テーブル値間が離れていると

き、またはテーブル化する領域としない領域との境い目は、補間を行わず、近傍のみをテーブル値での導関数で表わした近似関数で表わせる場合は、44にてその近傍の領域（近傍及び外挿領域）と近似関数を設定する。特に高次の導関数による近似計算を考えることによりテーブルの密度が少なく済み、記憶容量が大幅に削減出来る。実際、散乱の問題では散乱前の運動量空間3次元、散乱後の運動量空間3次元、合計6次元を考える必要があるため、限られた記憶容量ではテーブルの密度は小さくならざるを得ないため、近似計算は非常に効率的である。

【0013】図5は本発明の第2の実施例である。第2の実施例では、テーブル化していない領域の変数であるかの判定51を行ない、テーブル化されてなければ、関数計算をした後、散乱確率テーブルに書き込み追加52をする。すなわち、テーブルが使える領域が計算の過程で次第に増加する。散乱確率の計算では、3次元運動量空間を考える必要があるが、運動量の大きい領域程、空間を占める領域が大きくなるが、一般に粒子の存在確率が非常に小さくなる。例えば衝突電離が起きるような領域はシリコンの場合3次元運動量空間の過半数を占めるが、通常のMOSトランジスタ領域ではその領域に存在する粒子の確率は1万分の1以下である。そこで、このような例に対しては、低エネルギーの運動量でのみテーブル化を行ない、解析の過程で高エネルギーの運動量を持つ粒子が出現したときに、テーブルに書き込み追加すれば、粒子の出現しない運動量空間領域のテーブルを作る必要がないため、計算の無駄を省くことが出来る。テーブル化していない領域をテーブル化するのに制約条件を付けることも可能である。例えば、変数すなわち運動量空間領域をあらかじめ指定しておき、粒子が出現することはあっても再び出現する確率の少ない高エネルギー領域でのテーブル化を除外し、部分領域に粒子の出現が一定頻度以上であることを確認して初めてテーブル化するようにすれば、更に計算量が低減出来、記憶容量も節約出来る。

【0014】図6は図5に示した実施例を変形した第3の実施例である。本実施例では、第2の実施例に対して、更に散乱確率テーブルの再構成を行なうものである。図5のようにテーブルを時間とともに追加していく場合、必ずしも最適なテーブル構成となるとは限らない。そこで、予め設定していたある時間間隔かまたは記憶領域に余裕が無くなるなどの解析過程での要因により、テーブルの再構成を行なう。テーブルの再構成の判断基準としてテーブルの補間精度62と変数の出現頻度63がある。内挿計算を行なうためにはテーブルはある間隔以下である必要であるが、必要以上に間隔が狭ければテーブルを削減出来る。また、部分領域における変数の出現頻度を見直し、一度テーブルを作ったが、その後の領域での出現頻度が少ない場合、64においてテー

ブル値の一部を消去し、テーブルを再構成する。

【0015】図7には本発明における散乱確率テーブルの管理方法の一実施例を示す。n次元変数空間をメッシュ分割することによりメッシュ71毎にテーブル点72を管理する。具体的変数値に対してテーブルを参照するとき、具体的変数値が例えば3次元運動量空間であれば参照すべきテーブルの探索の効率化は重要課題である。メッシュ分割することにより探索を階層的に行なえるため、工数削減が出来る。特に本発明の第3の実施例の場合メッシュ毎にメッシュ内の変数すなわち運動量を持つ粒子の出現頻度を記録することにより、テーブルの再構成のための部分領域として用いることが出来る。

【0016】図8は図7に対応した散乱確率テーブルの構造の一例を示す。メッシュ番号81毎にサブ番号82を設けて管理を行なうことにより対応するテーブルの参照が効率化出来る。

【0017】また、図9は図7において散乱確率テーブル化のために具体的に計算が必要になった新しい変数点91を関数演算する代わりに、あらかじめメッシュ92単位にテーブル化する93のようなテーブル化するための離散化した点を設定しておき具体的に計算が必要になった変数値で関数演算をしてテーブルを作成するものである。このようにするとテーブル化する点を決めることによりテーブルの管理が容易になる。

【0018】図10には前記実施例と従来法の演算量を比較したして前記実施例の効果を示す。従来法では毎回演算する場合202のように変数参照回数に比例して累積演算量が増加する。テーブル化をする場合、203のように始めにテーブル化のために多くの計算を必要とするが、その後は1次の増加を示す。その増加の傾きは毎回演算する場合に比べ小さいものの出現頻度が少ない領域にたいしても散乱確率テーブルを使っているため非効率的であるため高速化は不十分である。一方前記実施例では関数演算を繰り返しながら散乱確率テーブルを形成するもので、201のように始めは関数演算を繰り返してテーブルを形成するので変数参照回数当たりの計算量が多いが次第にテーブルを参照するようになるので次第に演算量が減る。

【0019】

【発明の効果】本発明によれば乱数的変数による複雑な関数演算を含むモンテカルロ法を高速化出来、それに伴い物理現象理解の促進が期待される。

【図面の簡単な説明】

【図1】本発明に係わる一実施例のフローチャート

【図2】実施例のテーブルの構造

【図3】実施例を1次元の場合に適用したグラフ

【図4】実施例に於けるテーブル補間法の一例

【図5】本発明の第2の実施例のフローチャート

【図6】本発明の第3の実施例のフローチャート

【図7】本発明におけるテーブル管理方法の一実施例

【図8】図7に対応したテーブル構造の一例

【図9】図7において候補点を設定して散乱確率テーブルを作成するもの

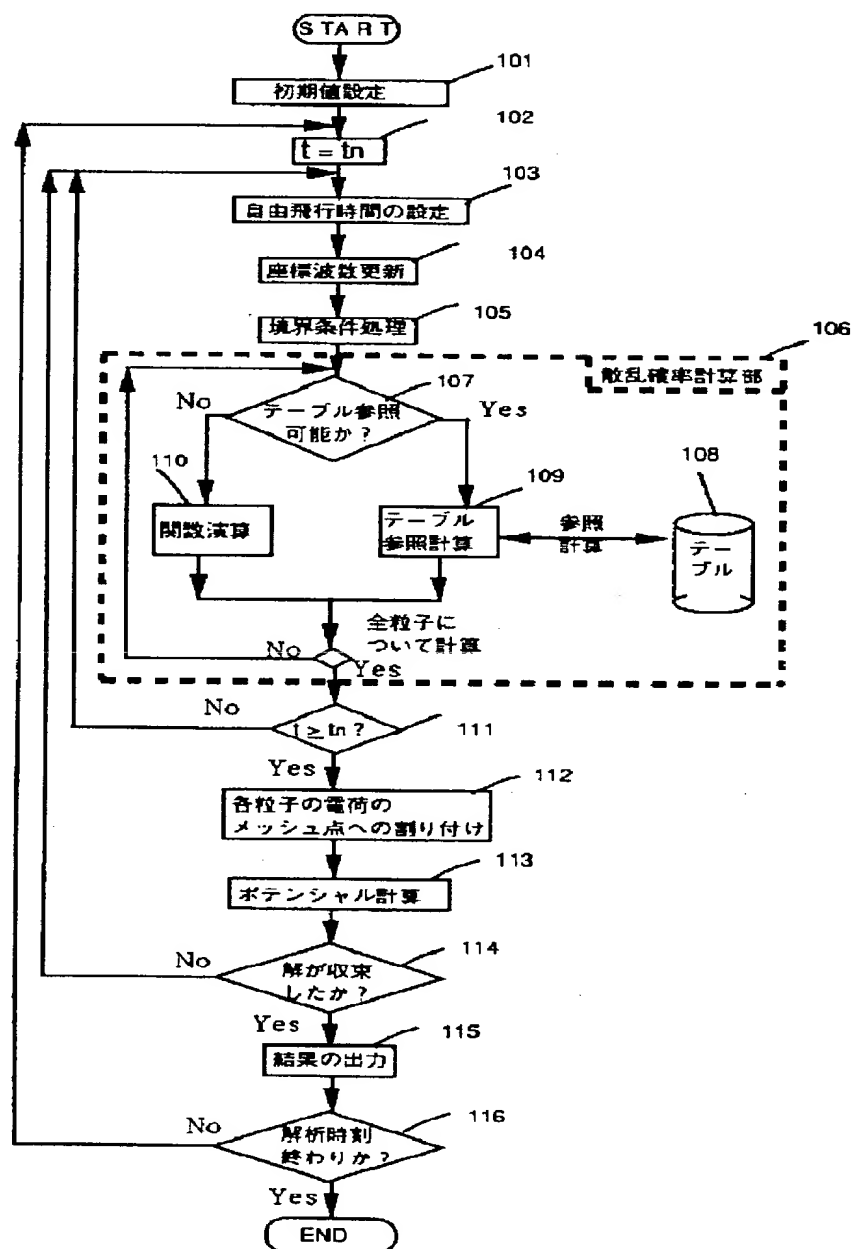
【図10】前記実施例と従来法の演算量の比較である

【符号の説明】

106…散乱確率計算、107…各粒子各散乱機構について散乱確率テーブル参照が可能かどうかの判断、108…テーブル、109…テーブル参照計算、110…関数演算。

【図1】

(図1)





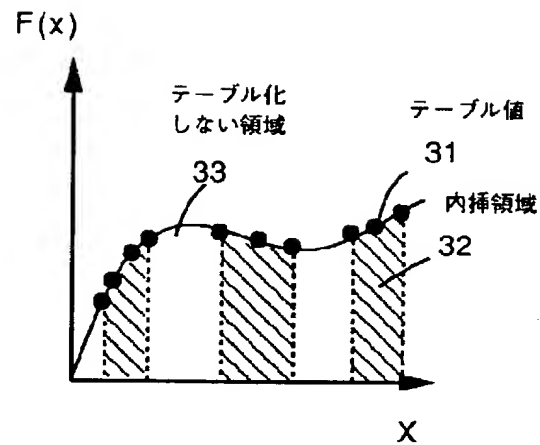
【図2】

(図2)

項番	21 離散の変数値		22 テーブル値
	X	Y	F(X,Y)
1	---	---	----
2	---	---	---
3	---	---	---
---	---	---	---

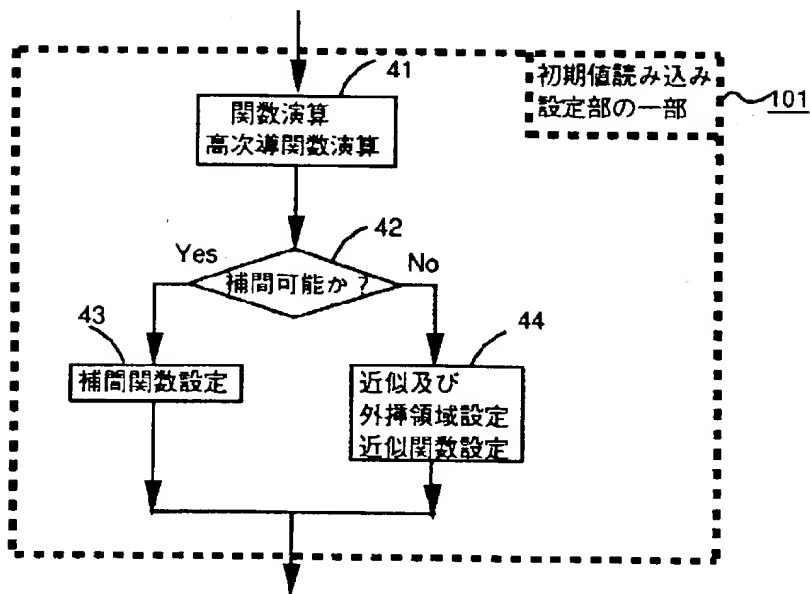
【図3】

(図3)



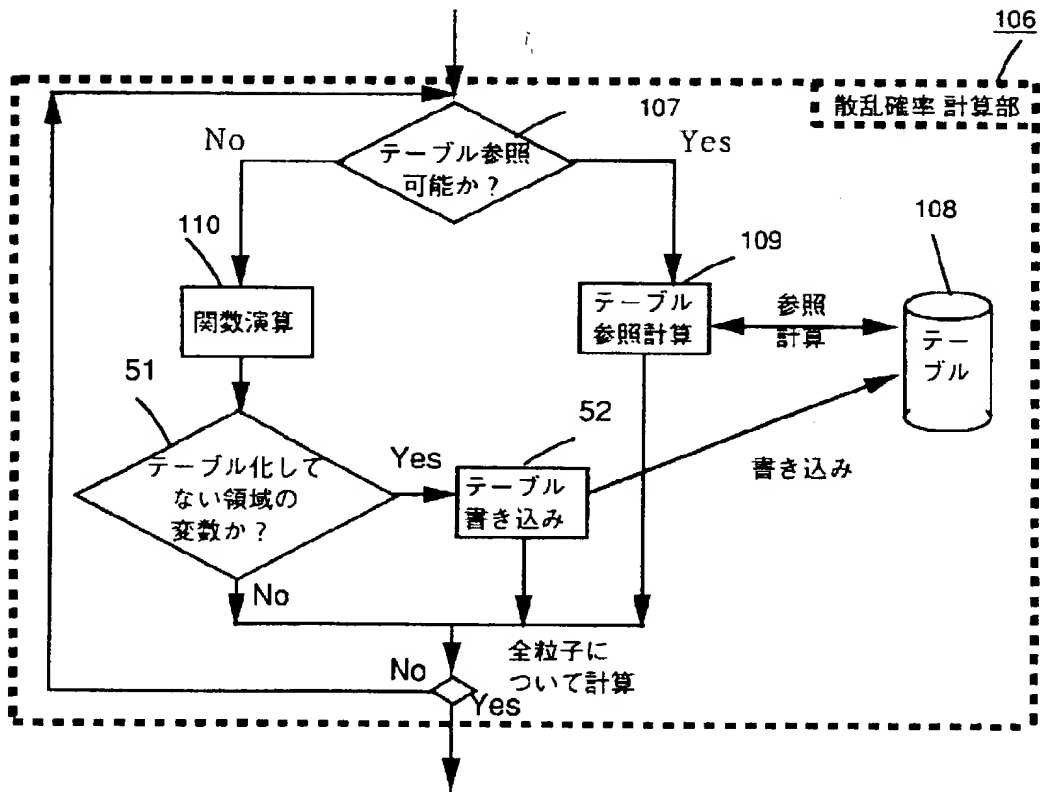
【図4】

(図4)



【図 5】

(図 5)

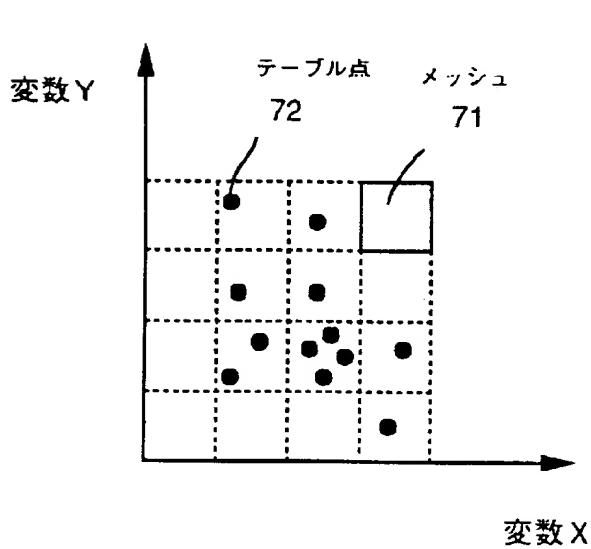


【図 7】

【図 8】

(図 7)

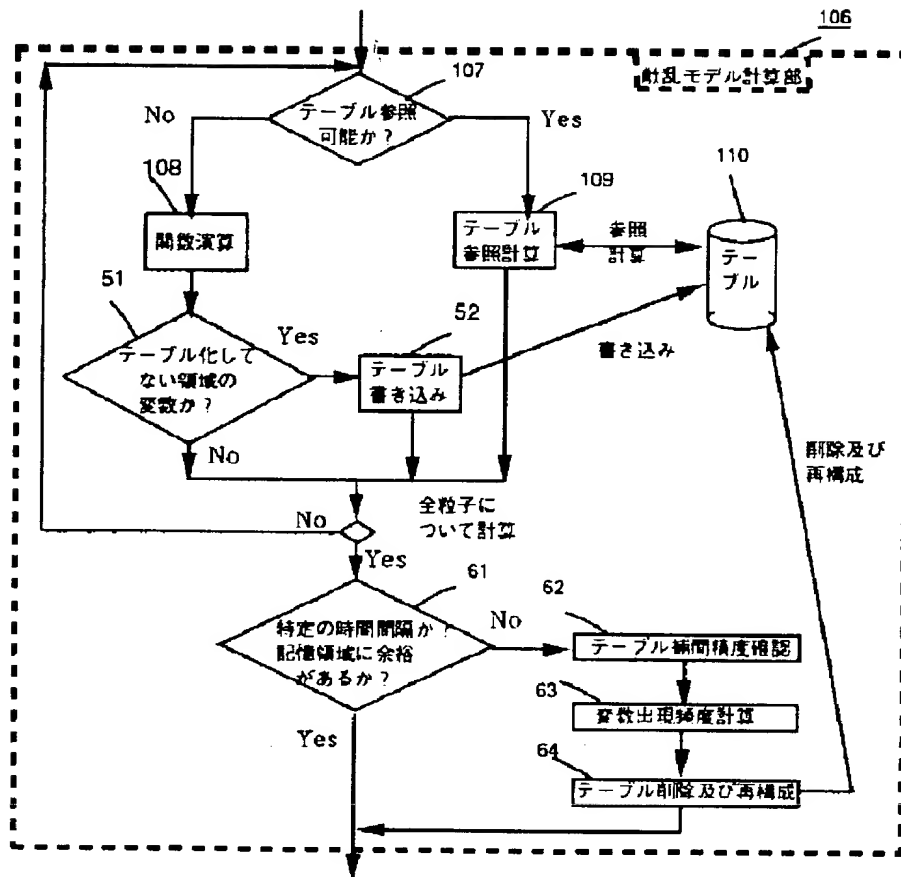
(図 8)



81		83		84
メッシュ番号		離散の変数値		テーブル値
		X	Y	F(X,Y)
1	---	---	---	---
	---	---	---	---
	---	---	---	---
	⋮	⋮	⋮	⋮
2	⋮	⋮	⋮	⋮
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
⋮	---	---	---	---

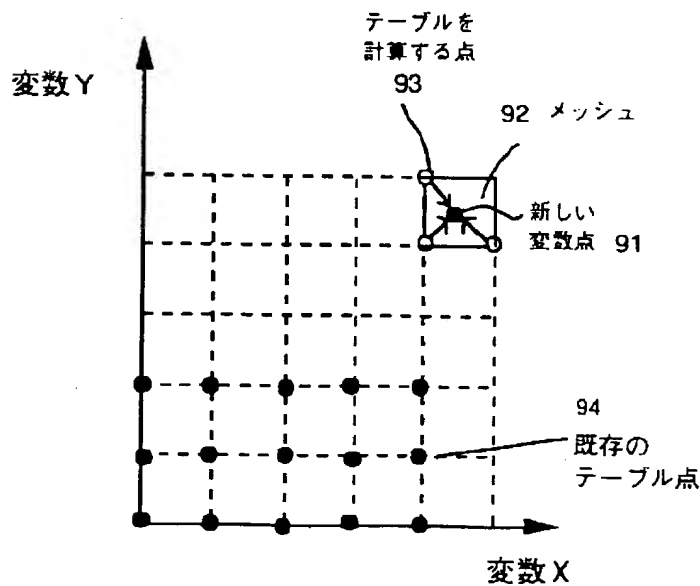
【図6】

(図6)



【図9】

(図9)



【図10】

(図10)

